



TITLE:

ハイゼンベルグモデルの対称性(物性研短期研究会「低次元系の磁場効果,分数統計,量子スピン系等の諸問題」報告,研究会報告)

AUTHOR(S):

斎藤, 理一郎

CITATION:

斎藤, 理一郎. ハイゼンベルグモデルの対称性(物性研短期研究会「低次元系の磁場効果,分数統計,量子スピン系等の諸問題」報告,研究会報告). 物性研究 1991, 55(5): 517-521

ISSUE DATE:

1991-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94450>

RIGHT:

A Current Algebra Approach to the Kondo Effect

Univ. of British Columbia Ian Affleck

The kondo effect is studied using current algebra techniques which allow a separation of charge and spin degrees of freedom. An algebraic interpretation of the low temperature fixed point is obtained. The Wilson ratio is shown to be the ratio of the specific heat for the total system to that of the spin sector which is expressed in terms of the conformal anomaly parameter of a Kac-Moody theory.

フェルミオン系のモンテカルロシュミレーション

東大・物性研 初 貝 安 弘

絶対零度でのフェルミオン系を新しい量子モンテカルロ法により調べた。具体的には Hubbard model の場合^{REF1}と比較しながら, 2-band model (1, 2次元 d-p model, 1次元 periodic Anderson model) に対してこの方法を適用してレベル差, 占有率とモーメント分布, スピン相関, 超伝導相関の関係など, 調べた結果を報告した。

更に, 分数統計粒子の数値シュミレーションについても計算の一部を報告した^{REF2}。

Ref. 1: M. Imada and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. 58(1989) 3752.

Ref. 2: Y. Hatsugai, M. Kohmoto and Y. S. Wu: in preparation.

ハイゼンベルグモデルの対称性

電通大・電子 斎 藤 理一郎

二次元正方格子反強磁性ハイゼンベルグモデルの有限個のスピン数 N に対する対角化では, 対称性によって考えている空間の次元を少なくする事ができる。しかし考え得る全ての対称性を取り入れたとき, 何次元迄下がるかは自明ではない。この間に答えるには対称群の知識が有効であり, 簡単な計算でその答えを得ることができる。

スピン数 $N=10$ を例にとって説明する。ハミルトニアンは, 互換 P_{ij} を用いて,

$$H = \frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (P_{ij} - \frac{1}{2}). \quad (1)$$

と書けることが知られている。同様にハミルトニアンと可換な T ($[H, T] = 0$) も, 置換演算子で以下のように書ける。

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & N-1 & N \\ r_1 & r_2 & r_3 & \cdots & r_{N-1} & r_N \end{pmatrix}. \quad (2)$$

このように置換 T は系の対称性を表し、関数式 $[H, T_1 T_2] = T_1 [H, T_2] + [H, T_1] T_2 = 0$ から T は、置換の群である対称群の部分群になる（対称操作群）。このような T を見つけるのは、関数式 $P_{r,ir,j} T = T P_{ij}$ から

$$[H, T] = \left(\sum_{\langle i,j \rangle} P_{ij} - P_{r,ir,j} \right) T = 0. \quad (3)$$

が満たされれば良い。例えば、 $N=10$ の場合にはハミルトニアンと可換な操作は $10!$ 個の置換の中に 240 個存在した。この可換な操作を探すプログラムはアルゴリズムを工夫すれば、 N が大きくなってもほとんど時間をかけずに得ることができる。

一般的な方法に従って、その対称操作 T のつくる群の指標表を求めた（表 1）。これと $S_{tot} = S$ の空間の可約指標（表 2）から、 $S_{tot} = S$ の空間を規約表現に分解した（表 3）。可約指標は、 $S_{tot} = S$ の空間が対称群の規約表現であることを用い、一般のヤング図形に対応する指標の方法を用いて求めた（Appendix 参照）。全ての固有ベクトルは、いずれかの規約表現に属するので、対角化は規約表現毎にすればよい。従って対称性によって得ることのできる最小の次元は、上記の規約分解によって知ることができる。

特に基底状態を含む空間は、Marshall の対称性を持つ $S_{tot} = 0$ の Γ_2 であるので、上の答えとして 3 次元まで下がることを示している。一般に、二つの部分格子に分けられる系の基底状態は、 $N = 4m$ (m は整数) の場合は Γ_1 に、 $N = 4m + 2$ の場合は Γ_2 に存在する。また実際の数値計算によって得られた全ての励起状態の縮重度は、対応する規約表現の次元と一致した。このことは考え得る対称性がこれで十分であることを示している。この結果を $N=20$ まで調べ、中川・夏目によってパターン解析から得られた結果と同じ次元数を得た。

表 4 に今回群論で得られた、基底状態を求めるために必要な最小な次元をまとめた。表 5 は、単位胞が正方形でない場合で対称操作の群の点群の C_{Nv} (1 次元) の場合である。この場合は、対称性が表 4 の場合に比べて低いので、最小の次元が大きくなっている。実際の対角化の方法等詳しい結果の報告に関しては、論文（投稿準備中）を参照されたい。本研究は、石野隆（東大、現東芝総研）、上村洸（東大）、との共同研究である。

表 1. $N=10$ の対称操作群の指標

	1	24	15	20	10	20	30	1	24	15	20	10	20	30
	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7	C_8	C_9	C_{10}	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_3	1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1
Γ_4	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1
Γ_5	4	-1	0	1	2	-1	0	4	-1	0	1	2	-1	0
Γ_6	4	-1	0	1	2	-1	0	-4	1	0	-1	-2	1	0
Γ_7	4	-1	0	1	-2	1	0	4	-1	0	1	-2	1	0
Γ_8	4	-1	0	1	-2	1	0	-4	1	0	-1	2	-1	0
Γ_9	5	0	1	-1	1	1	-1	5	0	1	-1	1	1	-1
Γ_{10}	5	0	1	-1	1	1	-1	-5	0	-1	1	-1	-1	1
Γ_{11}	5	0	1	-1	-1	-1	1	5	0	1	-1	-1	-1	1
Γ_{12}	5	0	1	-1	-1	-1	1	-5	0	-1	1	1	1	-1
Γ_{13}	6	1	-2	0	0	0	0	6	1	-2	0	0	0	0
Γ_{14}	6	1	-2	0	0	0	0	-5	-1	2	0	0	0	0

表 2. $S_{tot}=S$ の可約指標 (Appendix 参照)

	1	24	15	20	10	20	30	1	24	15	20	10	20	30
	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5	C_6	C_7	C_8	C_9	C_{10}	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}
$\Gamma_{S=0}$	42	2	2	3	6	3	2	-10	0	-10	-1	-10	-1	-2
$\Gamma_{S=1}$	90	0	2	3	14	-1	2	10	0	10	1	10	1	2
$\Gamma_{S=2}$	75	0	3	0	15	0	-1	-5	0	-5	-2	-5	-2	-1
$\Gamma_{S=3}$	35	0	3	2	11	2	-1	5	0	5	2	5	2	1
$\Gamma_{S=4}$	9	-1	1	3	5	-1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma_{S=5}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

表 3. $S_{tot} = S$ の空間を規約表現に分解した結果

$$\begin{aligned}
\Gamma_{S=0} &= 3\Gamma_2 + 2\Gamma_6 + \Gamma_7 + 2\Gamma_{10} + \Gamma_{12} + 2\Gamma_{13} \\
\Gamma_{S=1} &= 3\Gamma_1 + \Gamma_6 + 4\Gamma_7 + 2\Gamma_8 + 3\Gamma_9 + \Gamma_{10} \\
&\quad + 2\Gamma_{11} + \Gamma_{12} + \Gamma_{13} + 3\Gamma_{14} \\
\Gamma_{S=2} &= 2\Gamma_2 + 2\Gamma_7 + 3\Gamma_8 + 2\Gamma_9 + 3\Gamma_{10} + \Gamma_{11} \\
&\quad + \Gamma_{12} + 2\Gamma_{13} + \Gamma_{14} \\
\Gamma_{S=3} &= 2\Gamma_1 + 2\Gamma_7 + \Gamma_8 + 2\Gamma_9 + \Gamma_{10} + \Gamma_{14} \\
\Gamma_{S=4} &= \Gamma_2 + \Gamma_7 + \Gamma_8 \\
\Gamma_{S=5} &= \Gamma_1
\end{aligned}$$

表 4. 正方形の Unit cell の 1 次元表現

N	n_r	g	n_0	Γ_1	Γ_2
10	14	240	42	0	3
16	20	384	1430	18	3
18	18	144	4862	20	60
20	14	80	16796	269	193

太字 : Marshall 対称性
 n_r : 類の数
 g : 元の数
 n_0 : $S_{tot}=0$ の次元
 Γ_1 : Γ_1 の次元
 Γ_2 : Γ_2 の次元

表 5. C_{NV} の Hamiltonian の 1 次元表現

N	n_r	g	n_0	Γ_1	Γ_2
10	8	20	42	0	6
12	9	24	132	12	2
14	10	28	429	7	27
16	11	32	1430	65	30
18	12	36	4862	105	175
20	13	40	16796	490	364
22	14	44	58786	1221	1473
24	15	48	208012	4588	4126
26	16	52	742900	13858	14782
28	17	56	2674440	48678	46962
30	18	60	9694845	159982	163414
32	19	64	35357670	555885	549450

太字 : Marshall 対称性
 n_r : 類の数 $= (3+N/2)$
 g : 元の数 $= 2N$
 n_0 : $S_{tot}=0$ の次元
 Γ_1 : Γ_1 の次元
 Γ_2 : Γ_2 の次元

Appendix $S_{tot}=S$ の可約指標の計算方法

"M. Harmermesh: Group theory and its application to physical problems §7-4 p.201"

- $S_{\text{tot}} = S$ は、対称群 ($N!$ 個の置換の群) の規約表現 ($\lambda = (\frac{N}{2} - S, \frac{N}{2} + S)$)

- 対称群の規約表現の指標: $\chi_{[q] \dots \text{類}}^{[\lambda] \dots \text{規約表現}}$

$$\lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M\} \quad \text{規約表現} = \text{Young図形} \rightarrow \text{分割数} \left(\sum_{i=1}^M \lambda_i = N \right)$$

$$\ell = \{\ell_1, \ell_2, \dots, \ell_L\} \quad \text{類} = \ell_i - \text{巡回置換} \rightarrow \text{分割数} \left(\sum_{i=1}^L \ell_i = N \right)$$

- 例: $N=4$, $\chi_{(2,1^2)}^{(3,1)} \dots \text{規約表現}$

図 1: (3,1) の Young 図形

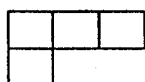


図 2-1: 1 行目から入れた場合

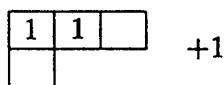


図 2-2: 2 行目から入れた場合

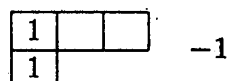
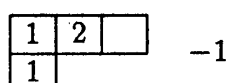
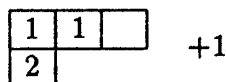
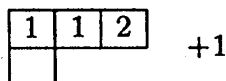


図 3: 2 を入れた場合



- 左図の様に, 規約表現 (3, 1) に対応する, Young 図形 (1 行目 3 個, 2 行目 1 個) をつくる。

- Young 図形に類の分割数に対応する, (2, 1, 1) 個の dots (数字) を入れる。ここでは, 1 を 2 個, 2 を 1 個及び 3 を 1 個, 合計 4 個の数字を左のますに入れる。

- 入れる規則(regular application):

(a) 数字の小さい方から入れる。

(b) 数字は, 左からつめて入れる。何行目のますから初めてもよいが, 同じ列の上の行が空いている場合は上に進む。一つ上に進むと符号として -1 がかかる。

例の場合, まず 1 を入れると図 2-1, 2-2 の 2 通りが考えられる。図の符号はそれぞれ +1, -1 である。次に 2 を左からつめて入れると図 3 の 3 通りがあり, 残りのますに 3 が入る。

(c) 数字が全部入ったとき, Young 図形は左から右, 上から下に数字が大きくなるように入らねばならない。

(d) 又同じ数字が離れて存在してはいけない。

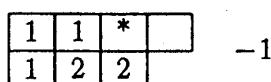
(e) 各々の図形の指標への寄与は上の符号で与えられ, +1 (even application) か -1 (odd application) である。

- 求める指標は, 考えられる 3 つ図形の寄与を足して,

$$\chi_{(2,1^2)}^{(3,1)} = +1 - 1 + 1 = 1$$

のように得られる。

図 4: 規則 (c) に合わない例



- 注: (c) の注意は必要である。(b) で上の行が空いているが, 入れる数の個数が足りなくて, 上の行にいけない場合がある (図 4)。この場合は * の位置に 3 が入るので除かなければならない。